

学校编码: 10384
学号: 19920111152801

分类号__密级__
UDC__

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

便携式等离子激元增强拉曼光谱仪器软系统集成

The Soft System Integration of Portable
Plasmon-Enhanced Raman Spectroscopy Instrumentation

张凤玲

指导教师姓名: 王磊 副教授

专 业 名 称: 机械电子工程

论文提交日期: 2014 年 4 月

论文答辩时间: 2014 年 5 月

学位授予日期:

答辩委员会主席: __

评阅人: __

2014 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（ ） 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

（ ） 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

摘要

拉曼光谱仪在分析化学、安全检查、生物医学等领域有重要应用前景。国家重大科学仪器设备开发专项子项目“PERS 仪器系统集成”需要解决便携式拉曼光谱仪器拥有自动化控制、数据库、数据分析处理和用户操作界面等问题，本文主要工作是针对其软系统集成进行了设计和开发。

本文提出了基于面向对象的软件工程方法的仪器软系统集成，在 VS2010 开发环境中使用 C++语言和 MFC 进行了便携式等离子增强拉曼光谱仪器软系统集成。主要工作包括：1.根据项目任务书的要求，征求仪器设备用户、硬件研制人员对软件功能、性能、安全性等方面的需求对项目进行了软系统需求分析，并形成《软件需求规格说明书》。2.根据需求分析的结果，对整个软系统进行了概要设计，将其拆分成四个子系统，并且对四个子系统功能实现进行了详细的设计。3.选择 C++语言，遵守编码规范，利用 MFC 对各个子系统中各个功能进行代码实现，并对人机界面进行风格设计和实现。4.利用白盒测试法和黑盒测试法对实现的子系统中各功能进行测试，以及对整个软系统进行功能测试，排除软系统的错误，来保障软系统满足用户需求。5.将软系统应用到实际测量体系，得到软系统实际检测效果。

主要的创新之处在于该仪器软系统提出了拉曼测试分析向导。在向导对话框中，用户可以选择本次拉曼分析所属的类别与要测量的体系，软系统会弹出引导框，此引导框给出了智能化操作指导，无论操作人员是否专业，均可以按照引导框的引导完成相应体系的拉曼测试并获得分析结果。

目前，此软系统已应用到 PERS I 型和 PERS II 型仪器的检测模块中，并且已经应用到实际体系中测量，如孔雀石绿体系、砷体系、色素体系等等，达到了理想的检测效果。

关键词：便携式拉曼光谱仪；等离子增强；软系统

Abstract

Raman spectroscopy has an important application prospect in the field of chemistry, safety inspection, biomedical analysis. The subproject "PERS instrument systems integration" in major national scientific equipment developed special needs to address issues on portable Raman spectrometer with automated control, database, data analysis, and user interface. The main work in this paper is carried out on its soft system integration design and development.

This paper proposes a method to build software systems integration, based on object-oriented software engineering. C++ programming language and MFC are used to realize portable plasmon-enhanced Raman spectroscopy spectrometer soft systems integration in VS2010 development environment. The main work includes: (1) Analysed the soft system requirements and compiled the "software requirements specification", according to the mission statement of the project requirements and the needs of users and engineers in terms of soft system functionality, performance and security. (2) Made a preliminary design of the entire soft system, which is split into four subsystems. Made functionality detailed design in four subsystems. (3) Compliance with coding standards, wrote code to implement functionality using C++ language. Designed and realized human-computer interface. (4) Tested each subsystem features and functionality of the entire software system, using white box testing method and black box testing method, to eliminate errors of the soft system to meet users' needs. (5) Applied the soft system to actual measurement system to get the actual test results.

The main innovation lies in the software system provides a wizard for Raman test analysis. In the wizard dialog, users can select a category and a specific measurement system of the measuring system. After the specific measurement system is selected, the guide frame dialog will pop up, which gives intelligent guidance. No matter the users are professional or not, they could complete Raman test and obtain analytical results of the measuring system in accordance with the guide frame dialog.

Currently, the soft system has been applied to detection module in the PERS I and PERS II type instrument. And the soft system has been applied to the actual measurements, such as malachite green system, arsenic system, pigment system, etc., which achieves the ideal test results.

Keywords: Portable Raman Spectrometer; Plasmon Enhancement; Soft Systems

厦门大学博硕士论文摘要库

目录

第一章 绪论	1
1.1 等离子体增强拉曼光谱概述	1
1.2 便携式拉曼光谱仪软件研究现状	2
1.3 软件工程与软系统概述	7
1.4 本文主要研究内容	8
第二章 便携式等离子体增强拉曼光谱仪器软系统需求分析	9
2.1 需求分析	9
2.1.1 需求分析工作内容	9
2.1.2 需求分析注意事项	10
2.2 软系统需求分析	11
2.2.1 功能需求分析	11
2.2.2 性能需求分析	14
2.2.3 安全性分析	15
2.3 本章小结	16
第三章 便携式等离子体增强拉曼光谱仪器软系统设计	17
3.1 软系统概要设计	18
3.2 子系统详细设计	20
3.2.1 光谱控制子系统设计	20
3.2.2 施加控制子系统设计	22
3.2.3 光谱数据子系统设计	23
3.2.4 人机界面设计	25
3.3 本章小结	26
第四章 便携式等离子体增强拉曼光谱仪器软系统实现	27
4.1 开发环境和语言选择	27
4.2 程序设计风格和编码规范	28
4.3 软系统实现	28
4.3.1 人机界面实现	28

4.3.2 光谱控制子系统实现.....	37
4.3.3 施加控制子系统实现.....	39
4.3.4 光谱数据子系统实现.....	41
4.4 本章小结.....	48
第五章 便携式等离子激元增强拉曼光谱仪器软系统测试	49
5.1 程序测试概述.....	49
5.2 软系统测试过程	50
5.3 软系统测试执行	51
5.4 本章小结.....	56
第六章 便携式等离子激元增强拉曼光谱仪器软系统应用	57
6.1 软系统应用到孔雀石绿体系测试结果	57
6.2 软系统应用到水中砷系测试结果	59
6.3 软系统应用到葡萄酒中色素体系测试结果	61
6.4 本章小结.....	62
第七章 总结与展望.....	63
7.1 总结.....	63
7.2 展望.....	64
参考文献.....	65
攻读硕士学位期间取得的科研成果	67
攻读硕士学位期间参与的科研情况	69
致谢	71

Contents

Chapter 1 Introduction	1
1.1 Introduction of Plasmon-enhanced Raman Spectroscopy	1
1.2 Research Status of Portable Raman Spectrometer Software	2
1.3 Introduction of Software Engineering and Soft Systems	7
1.4 The Main Contents of This Article	8
Chapter 2 Requirements Analysis of Soft System	9
2.1 Requirements Analysis	9
2.1.1 Work in Requirements Analysis	9
2.1.2 Precautions in Requirements Analysis	10
2.2 Requirements Analysis of Soft System	11
2.2.1 Functional Requirements Analysis	11
2.2.2 Performance Requirements Analysis	14
2.2.3 Security Analysis	15
2.3 Chapter Summary	16
Chapter 3 Soft System Design	17
3.1 Soft Systems Preliminary Design	18
3.2 Detailed Design of Subsystems	20
3.2.1 Spectral Control Subsystem Design	20
3.2.2 Exert Control Subsystem Design	22
3.2.3 Spectral Data Subsystem Design	23
3.2.4 Human Machine Interface Design	25
3.3 Chapter Summary	26
Chapter 4 Soft System Implementation	27
4.1 Development Environment and Language Selection	27
4.2 Programming Style and Coding Standards	28
4.3 Soft System Implementation	28
4.3.1 HMI Implementation	28

4.3.2 Spectral Control Subsystem Implementation.....	37
4.3.3 Exert Control Subsystem Implementation	39
4.3.4 Spectral Data Subsystem Implementation	41
4.4 Chapter Summary	48
Chapter 5 Soft System Test.....	49
5.1 Introduction of Program Testing	49
5.2 Soft System Test Process.....	50
5.3 Soft System Test Execution	51
5.4 Chapter Summary	56
Chapter 6 Soft Systems Application.....	57
6.1 Experimental Results of Applying to Malachite—Green System.....	57
6.2 Experimental Results of Applying to AS System	59
6.3 Experimental Results of Applying to Pigment System in Wine	61
6.4 Chapter Summary	62
Chapter 7 Summary and Outlook.....	63
7.1 Summary	63
7.2 Outlook.....	64
References	65
Research Output	67
Research Project	69
Acknowledgements.....	71

第一章 绪论

1.1 等离子体增强拉曼光谱概述

拉曼光谱 (Raman spectra) 是一种散射光谱^[1], 于 1928 年, 由印度物理学家 C.V.Raman 发现^[2], 产生原因简单地说就是光通过介质时由于入射光与分子运动之间相互作用而引起的光频率改变, Raman 因此获得 1930 年的诺贝尔物理学奖^[3]。

拉曼光谱是一种非弹性散射光谱。拉曼散射形式有两种, 一种为长波一侧的谱线称红伴线或斯托克斯线, 另一种为短波一侧的谱线称紫伴线或反斯托克斯线, 如图 1.1 所示, 频率差 ν_i 与入射光频率 ν_0 无关, 由散射物质本身的性质决定, 每种散射物质都有自己特定的频率差, 其中有些与介质的红外吸收频率相一致^[4]。

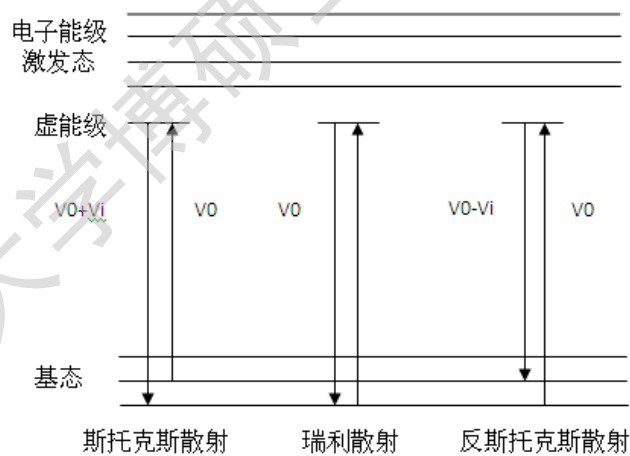


图 1.1 散射能级跃迁图

虽然拉曼光谱的特异性非常高, 但拉曼散射效应是个非常弱的过程, 拉曼散射的强度比弹性散射 (即瑞利散射) 要弱得多, 仅约为入射光强的 10^{-10} ^[5]。原因在于发生非弹性散射的光子很少, 导致测量受到限制。为了解决上述问题, 增强拉曼信号的增强技术应运而生。共振拉曼效应和表面增强拉曼散射是两种主要的方法, 这两种方法能够将拉曼信号增强好几个数量级。表面增强拉曼

(Surface-enhanced Raman Scattering, SERS)技术可以使分子的常规拉曼信号增强 10^6 倍^[6], 大大提高拉曼光谱的信号。在物理增强方面, SERS 效应主要由表面等离子体共振(Surface Plasmon Resonance, SPR)形成的电磁场增强引起。

基于上述增强拉曼信号技术的研究, 使得拉曼散射能够应用到实际生活当中去。拉曼技术特别适合带水的生物样品的检测^[7], 因水的拉曼光谱不会对其他物质的信号造成干扰, 因此在含水溶液、不饱和碳氢化合物、聚合物、生物和无机物质以及医药制品等方面的分析比红外光谱分析法优越^[8]。并且拉曼光谱技术具有非破坏性, 几乎不需要样品制备, 可直接测定气体、液体和固体样品等特点使得拉曼光谱仪有着不可估量的前景。拉曼光谱仪已经广泛应用于分析化学、安全检查、生物医学等领域, 小型化、智能化是其发展的重要方面。在药物检测、机场安检、爆炸物分析等领域便携式拉曼光谱仪受到青睐^[9]。

1.2 便携式拉曼光谱仪软件研究现状

便携式拉曼光谱仪由激光光源、拉曼探测头和光谱分析检测单元组成, 包括人机界面^[10]。如图 1.2 所示。

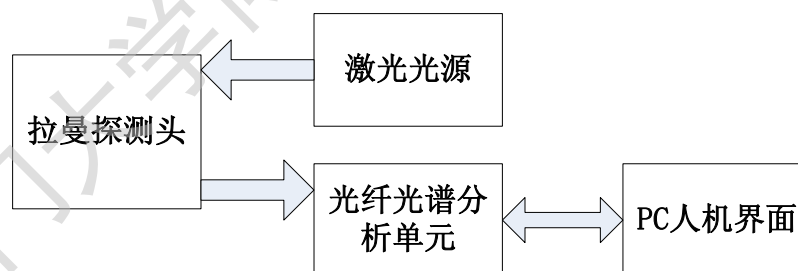


图 1.2 便携式拉曼光谱仪构造原理图

便携式光谱仪的分辨率大多集中在 $6\text{-}30\text{cm}^{-1}$ 之间^[11], 通常以 785 纳米, 633 纳米和 532 纳米中的其中一种作为激发波长, 优点是轻、可携带, 性能稳定, 操作简单, 数据处理迅速。近年来, 便携式拉曼光谱仪的研究发展十分迅速。

在国外, 雷尼绍(Renishaw)、DeltaNu、必达泰克(B&W TEK)和海洋光学(Ocean Optics)公司纷纷推出高灵敏、高分辨率的便携式拉曼光谱仪^[12]和配套的软件。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库